Agilent 7200 Q-TOF for GC/MS

多様なアプリケーションで最高の定性と定量を実現

The Measure of Confidence

Agilent Technologies

Agilent 7200 Q-TOF for GC/MS—
最高の検出選択性を実現し、ターゲット化合物と未知化合物の両方を確実に分析

複雑なマトリックスや微量レベルの分析では、最高の定性および定量データが求められます。
Agilent 7200 Q-TOF for GC/MS はお客様のニーズにお応えする画期的な質量分析装置です。

困難な分析でも、最高の分解能、質量精度、フルスペクトル感度、MS/MS 選択性を実現

Agilent 7200 Q-TOF for GC/MS は、ガスクロマトグラフィー専用に設計された世界初の Q-TOF (四重極飛行時間型 MS) です。GC/MS 技術の限界を塗り替えるこのシステムには、実績のあるAgilent 7890 シリーズ GC の分離能力と 7000 シリーズトリプル四重極 GC/MS および 6500 シリーズ LC/Q-TOF システムの MS コンポーネントが組み合わされています。それにより、堅牢な GC/MS 動作、優れた選択性、高感度でのフルスペクトル取り込み、高速なデータ取り込みを実現し、分子キャラクタリゼーションや構造解析を容易にする精密質量データが得られます。

Agilent 7200 Q-TOF for GC/MS は、Agilent 7890 GC の定評ある分離能力と、TOF アナライザの優れた検出選択性および精密質量データを兼ね備えた、世界初の Q-TOF GC/MS です。

最高の定性および定量分析を実現するシステム

Agilent 7200 Q-TOF for GC/MS は、アジレントの GC/MS システムの定評ある各種機能に加えて、以下の最新機能も搭載しています。

優れた分解能と質量精度

低 ppm レベルの質量精度と、シングル四重極 MS の 15〜50 倍という分解能との組み合わせにより、ターゲット化合物、非ターゲット化合物、未知化合物の分析の信頼性がさらに向上します。

低い検出下限と優れた直線性

四重極 MS よりもすぐれた感度でのフルスペクトル取り込みにより、低 pg レベルでのほとんどの化合物の精密質量スペクトルを採取できます。デュアルゲインモードにより、ダイナミックレンジが 10^5 にまで広がります。

比類のない MS/MS 選択性

高分解能 MS/MS の検出選択性は、他の MS/MS アナライザを圧倒しています。さらに、精密質量プロダクトイオンスペクトルにより、ターゲットおよび非ターゲット化合物の確認や、未知化合物の解明が容易になります。

精密質量 MS および MS/MS データの解析を簡略化

Agilent MassHunter ソフトウェアが、定性、定量、確認に役立つ貴重なツールを提供します。

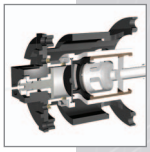
- EI または CI データに最適化されたデコンボリューションの適用により、複雑なサンプル中の化合物を検出
- 分子イオンおよびフラグメントイオンについてライブラリ検索結果と化学式の算出を組み合わせて、化合物同定を簡略化
- 質量分析データの解析用に設計された Mass Profiler Professional (MPP) により、複数の MS データファイルについて多変量統計解析を実行

精密質量データを使えば、最高の信頼性で化合物の定性と定量分析をおこなうことが可能です。

実証された性能と最先端の拡張機能

7890 GC の全機能

マルチモード注入口、高性能バックフラッシュ、高速低熱量カラム技術 (LTM) を搭載可能です。

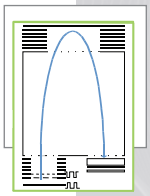


高感度のエクストラクタイオン源

最高 350 °C までの温度プログラムが可能で、複雑なマトリックスにも確実に対応します。

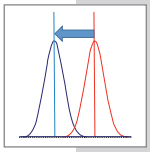
高温石英一体型四重極

分解能や感度を低下させずに 200 °C まで加熱することが可能で、高沸点化合物によるコンタミネーションを防ぎます。



安定した高性能 TOF 技術

アジレントのオーソゴナル TOF 技術により、多数の LC/TOF および LC/Q-TOF システムで実証済みの一貫した性能を実現します。



内部リファレンスマス (IRM) 補正

必要に応じて、イオン源に IRM 化合物を導入し、最高の質量精度を得ることが可能です。

取り外し可能なイオン源

トランスファーラインおよび真空インターロックポジションをコンピュータ制御することで、約 30 分で簡単にイオン源を交換できます。

Agilent 7200 Q-TOF for GC/MS の詳細については、
www.agilent.com/chem/jp をご覧ください。

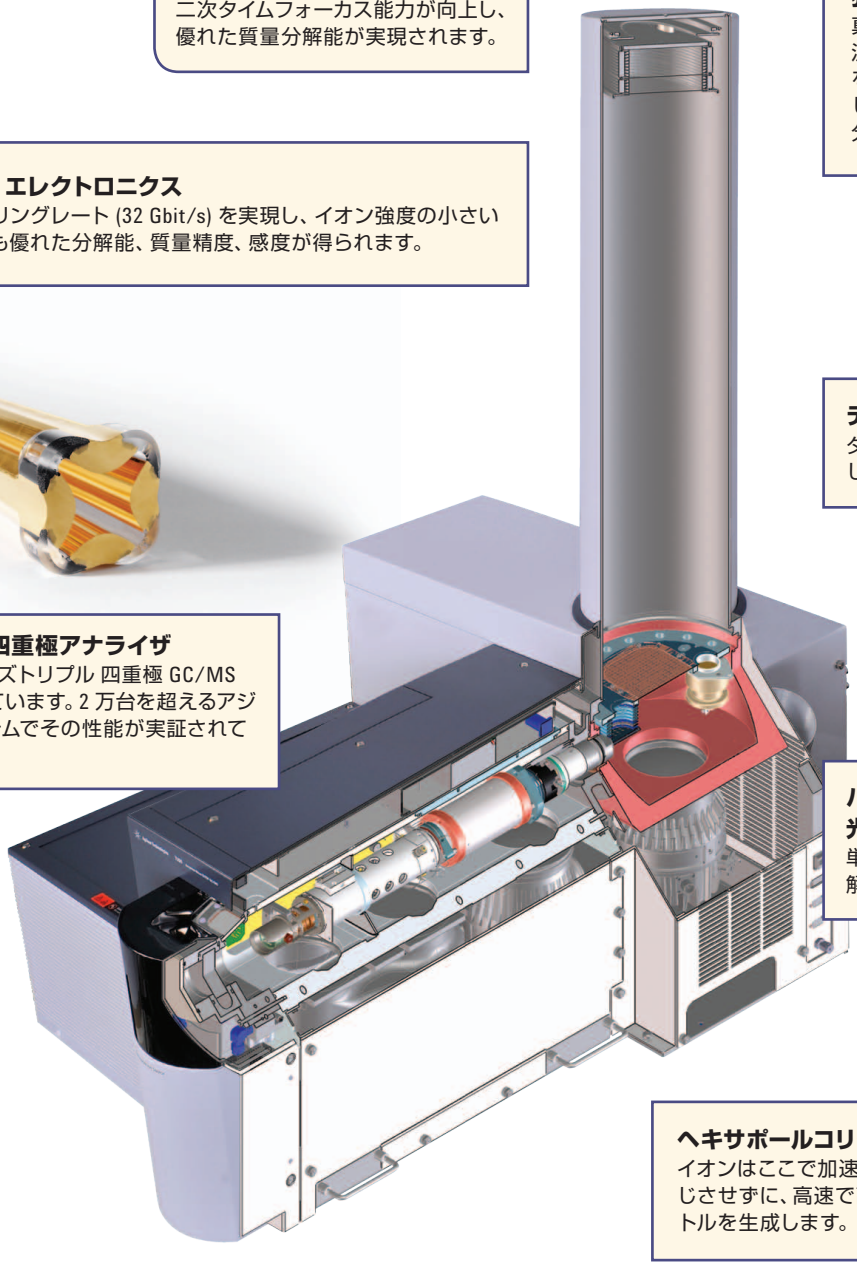
Agilent 7200 Q-TOF for GC/MS システムは、定評のある技術と独自の新機能を兼ね備えています。

デュアルステージのイオンミラー
二次タイムフォーカス能力が向上し、優れた質量分解能が実現されます。

独自の INVAR フライトチューブ
真空断熱シェル内に密封されており、温度変化に起因する熱質量ドリフトを防ぎ、常に優れた質量精度を維持します。長さを延長することで質量分解能が向上しています。

4GHz ADC エレクトロニクス
高速サンプリングレート (32 Gbit/s) を実現し、イオン強度の小さいサンプルでも優れた分解能、質量精度、感度が得られます。

デュアルゲインアンプ
ダイナミックレンジが 10^5 にまで拡大します。



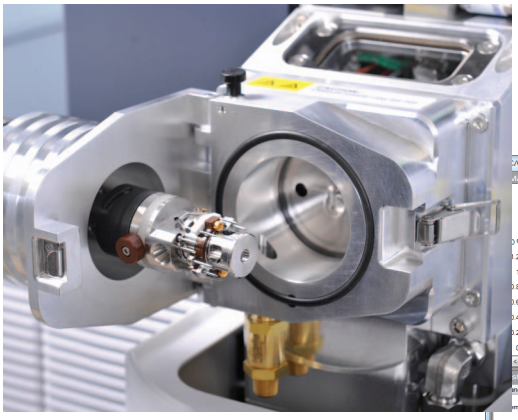
高温石英一体型四重極アナライザ
Agilent 7000 シリーズトリプル 四重極 GC/MS と同じものを用いています。2 万台を超えるアジレント製 MS システムでその性能が実証されています。

ハイブリッドチャンネルプレート光電子増倍管イオン検出器
単一イオン検出感度、優れた時間分解能、広い直線範囲を実現します。

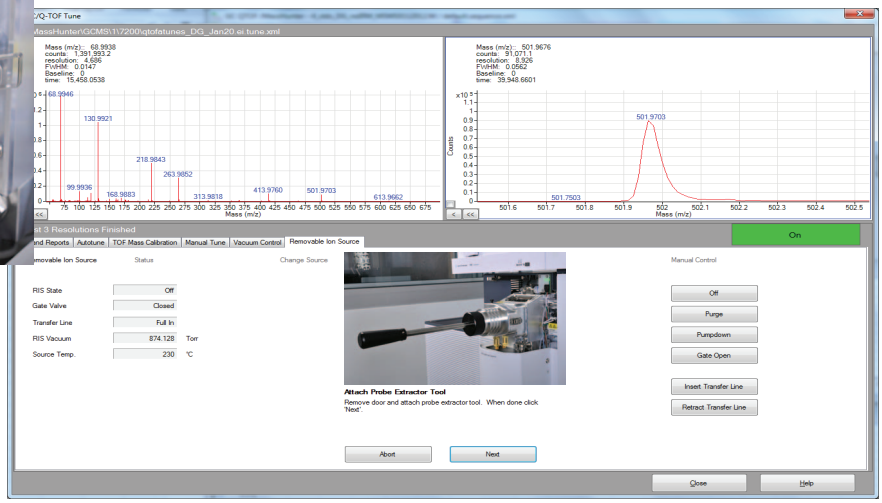
ヘキサポールコリジョンセル
イオンはここで加速され、クロストークを生じさせずに、高速で高品質の MS/MS スペクトルを生成します。

3 つのターボ分子ポンプ
2 つのシングルステージポンプと、イオン源および四重極アナライザ用のスプリットフローポンプで構成され、アナライザアセンブリのあらゆる領域で最適な真空排気を実現します。

優れた直線性と質量精度により、ターゲット化合物、非ターゲット化合物、未知化合物の分析を可能に



新しい取り外し可能イオン源 (RIS)
リペラー、イオンボリューム、エクストラクションレンズ、デュアルフィラメントといったイオン源全体を、真空を落とさずにおよそ 30 分で交換することが可能になっています。

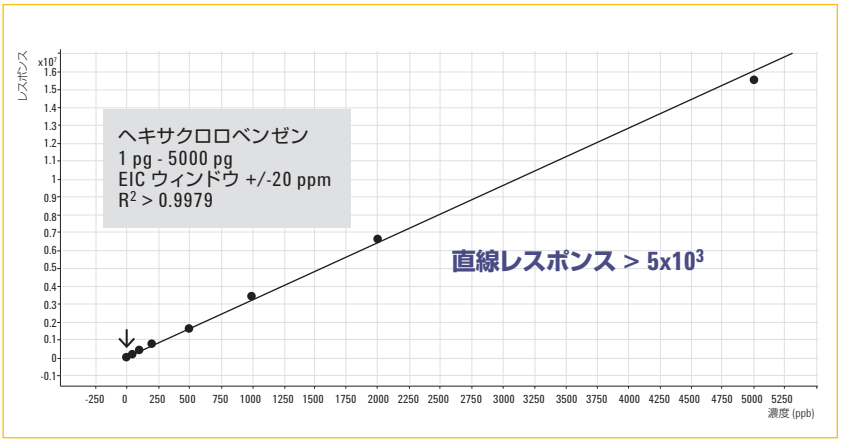


ユーザーフレンドリーなビデオとソフトウェア
イオン源の取り外しと設置に必要なすべての手順を説明し、プロセスの安全性とエラーのない交換を確保します。

pg オンカラム	質量誤差、ppm	
	2- ホルミルチオフェン	2- アセチルチアゾール
1	-3.57	-0.79
2	-4.46	-0.79
5	-2.68	-0.79
10	-2.68	0.79
20	-2.68	0.00
50	-0.89	1.57
100	0.00	1.57
200	-1.79	1.57
500	2.68	1.57
1000	1.79	-1.57
平均	-1.43	0.31

新しい内部リファレンスマス (IRM)
各スキャンでキャリブラント化合物に対して質量軸をロックする独自システムです。IRM により、きわめて複雑なクロマトグラフィー条件でも、低 ppm レベルの質量精度が実現します。

アナログデジタル変換器 (ADC) 検出器
4 GHz のサンプリングレートを備えた ADC エレクトロニクスにより、高分解能モードでの優れた直線性が実現します。低ゲインおよび高ゲインチャンネルの両方で検出器シグナルを同時に処理するデュアルゲインアンプにより、ダイナミックレンジを 10^5 にまで拡大し、直線範囲をさらに広げます。



Agilent 7200 Q-TOF for GC/MS の詳細については、
www.agilent.com/chem/jp をご覧ください。

高い分解能により、優れた定性・定量分析を実行し、信頼性の高い結果を提供します。

低 ppm の質量精度と優れた分解能を備えた Agilent 7200 Q-TOF for GC/MS なら、不確実性を排除し、偽陽性結果を最小限に抑え、データベース検索結果を確認し、未知化合物の分子式を推定することができます。

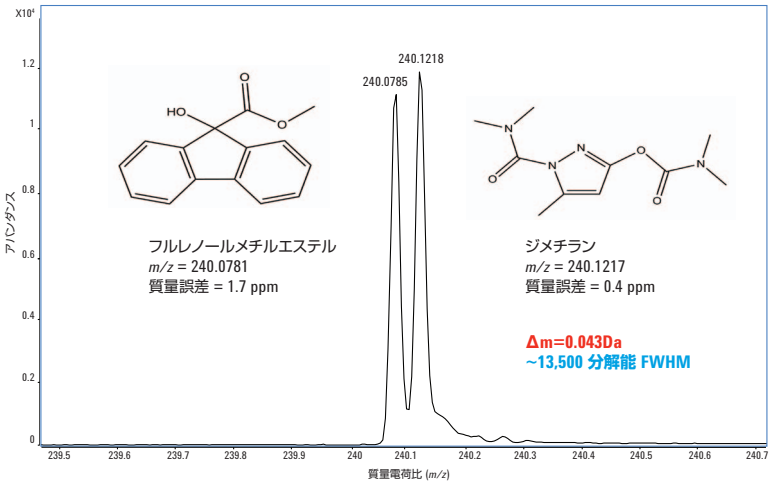
迅速で簡単な設定

アジレントの自動取り込みソフトウェアにより、チューニングおよび質量補正プロセスの各ステップをガイドし、高分解能および精密質量を得るための精密な操作を可能にします。

信頼性の高い同定に欠かせない優れた分解能

13,500 (FWHM) という分解能により、名目質量がともに 240 Da で、実際の質量差がわずか 0.0436 Da の 2 つの化合物でも簡単に識別します。

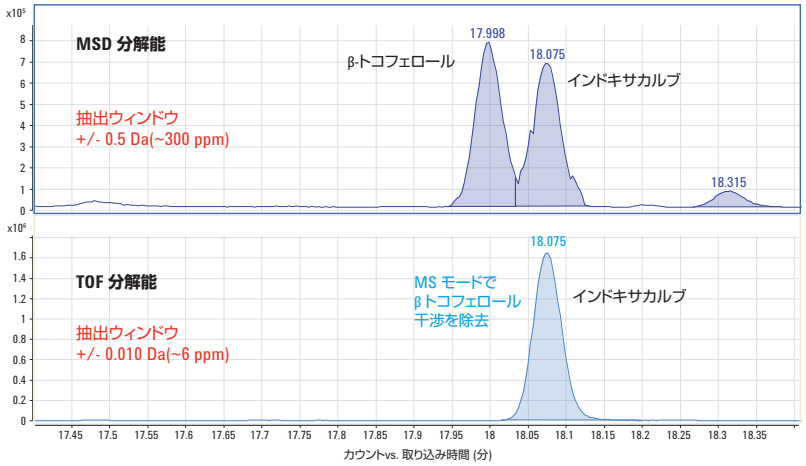
複雑なマトリックスに含まれる化合物を確実に同定するためには、優れた分解能が欠かせません。



精密質量によりマトリックス干渉を効率的に除去

0.010 Da の抽出ウィンドウを用いて、ターゲット化合物のフラグメントイオンであるインドキサカルブ (150.01195 Da) を、マトリックス干渉イオンの β-トコフェロール (150.06839 Da) から容易に分離することができます。これにより、信頼性の高い定量分析が実現します。

選択性を高める必要がある場合には、精密質量を用いた MS/MS により、ターゲット化合物とマトリックス干渉をさらに明確に分離することができます。

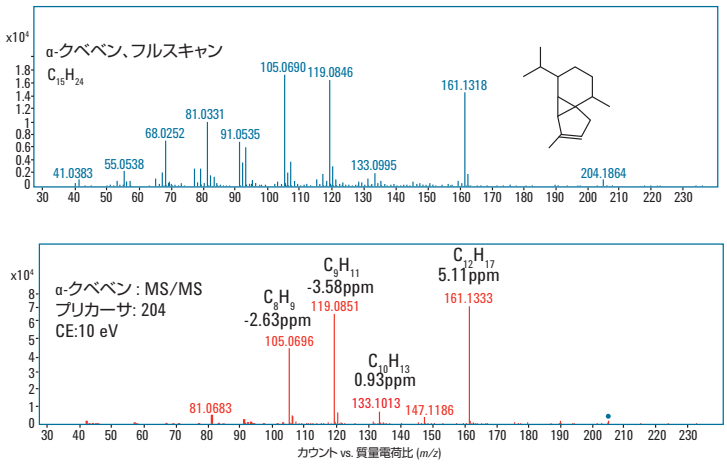


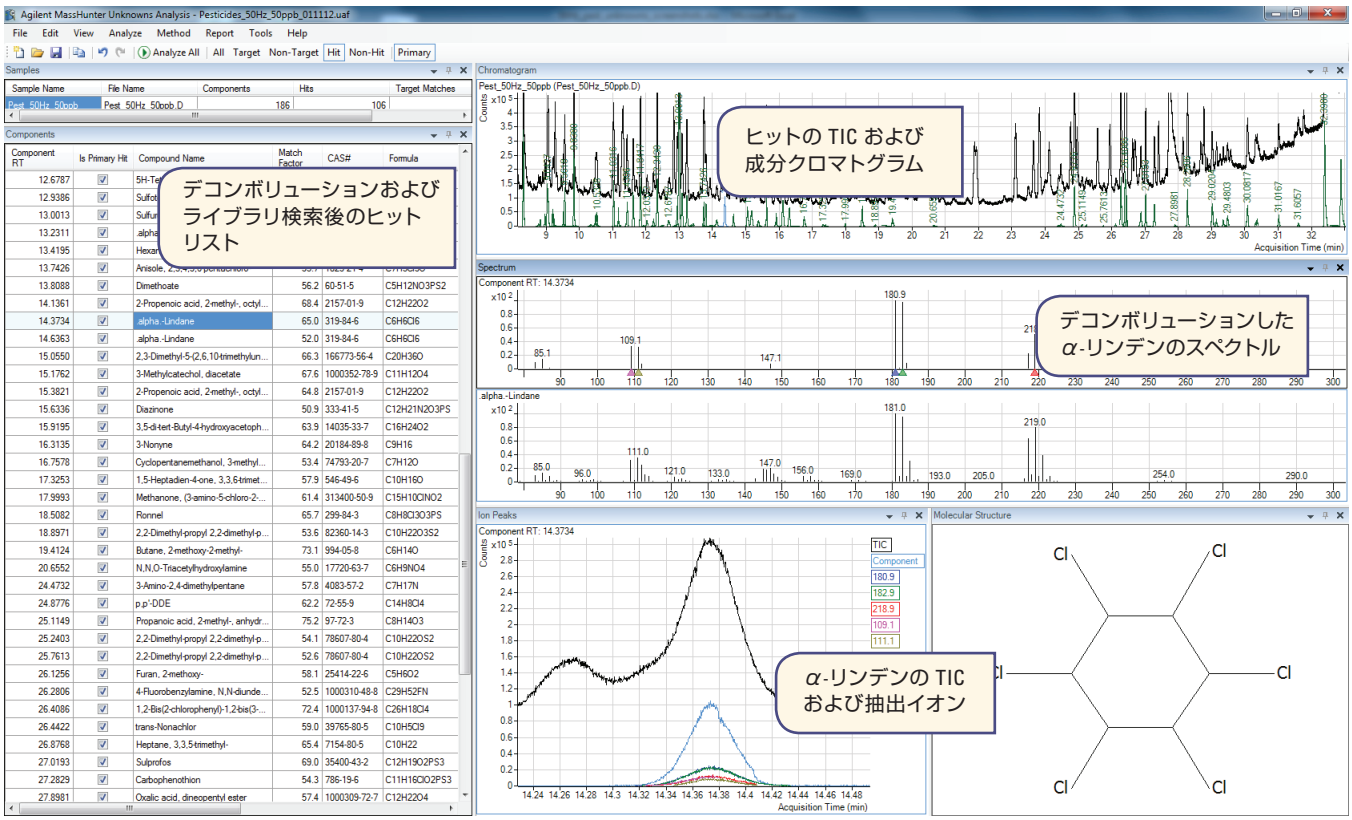
確実な構造解析とターゲット化合物確認

各種のテクニックを用いて、ターゲット化合物と未知化合物を確認・同定できます。

- EI スペクトルライブラリ検索の実施
- PCI 分子イオンの測定
- 複数のプリカーサイオンの MS/MSによるフラグメント経路の記録―アジレントだけの機能
- すべてのイオンについて精密質量データから分子式を算出

右の α-クベベンの例のようなきわめて複雑な分離では、MS/MS の選択性により単純化したスペクトルを生成し、構造解析を円滑化することも可能です。





TOF MS の利点である高速スペクトル取り込み : 最高 50 Hz というデータサンプリングレートにより、MassHunter の Unknowns Analysis ツールを用いたクロマトグラフィーデコンボリューションを用いて多数の成分を効率的に分離できます。

Agilent 7200 Q-TOF for GC/MS の詳細については、
www.agilent.com/chem/jp をご覧ください。

メタボロミクス

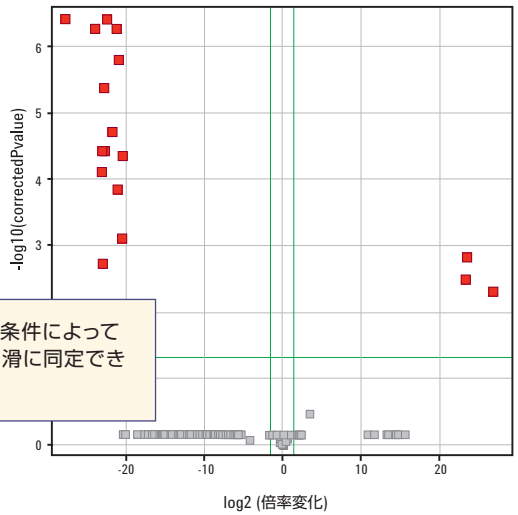
代謝物の変化の分析と視覚化

メタボロミクスは、特定条件下での代謝上の変化を解明するための強力なツールです。GC/Q-TOF の高感度フルスペクトルおよび質量精度と MS/MS の機能を用いることで、未知代謝物の構造解析ができます。7200 Q-TOF for GC/MS の広いダイナミックレンジにより、細胞に存在する幅広い代謝物の正確な同時定量が可能になります。

下記の実験では、7200 Q-TOF GC/MS により、精密質量データ、フルスキャンモードでの優れた感度、分析対象の全経路中間体の定性と定量に必要なダイナミックレンジが得られています。これにより、処理サンプルにおける関連生化学経路のステップを明確に解明することが可能になりました。

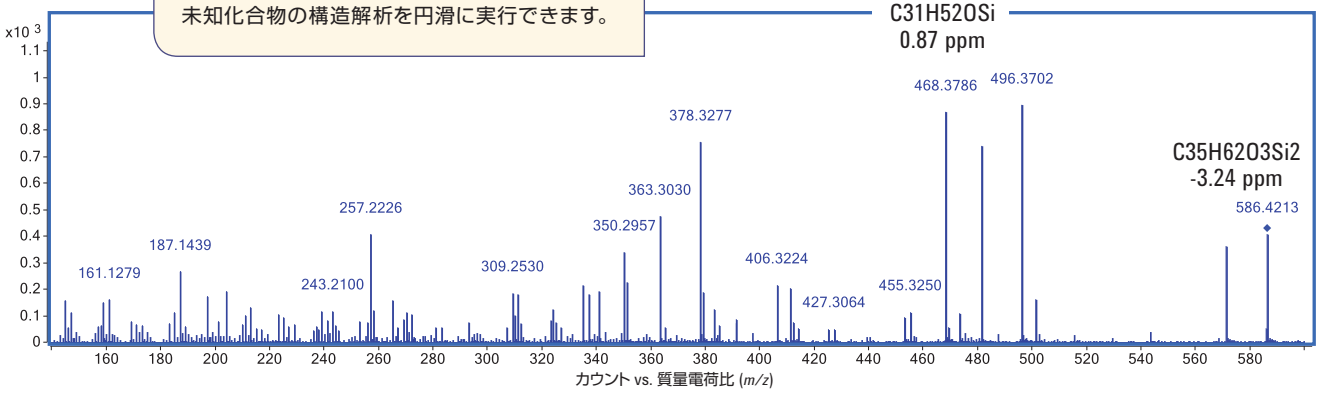
Mass Profiler Professional (MPP) ソフトウェアを用いて、統計的なデータ評価をおこないました。この解析には、データフィルタリング、ベースライン補正、有意性検定が含まれます。ソフトウェアの視覚化ツールも、データ解析には欠かせないツールです。

処理サンプルで大幅に変化した代謝物	処理サンプルにおける倍率変化	
スクアレン	2.5 (低下)	
ラノステロール	1.7 (上昇)	
4,4-ジメチル-5α-コレスタ-8,24-ジエン-3β-オール	1.4 (上昇)	エルゴステロールの生合成経路
4α-カルボキシ-4β-メチル-5α-コレスタ-8,24-ジエン-3β-オール	**360.8 (上昇)**	
ジモステロール	2.9 (低下)	
エルゴステロール	1.3 (低下)	



MPP の有意性解析により、条件によって濃度が変化する代謝物を円滑に同定できます。

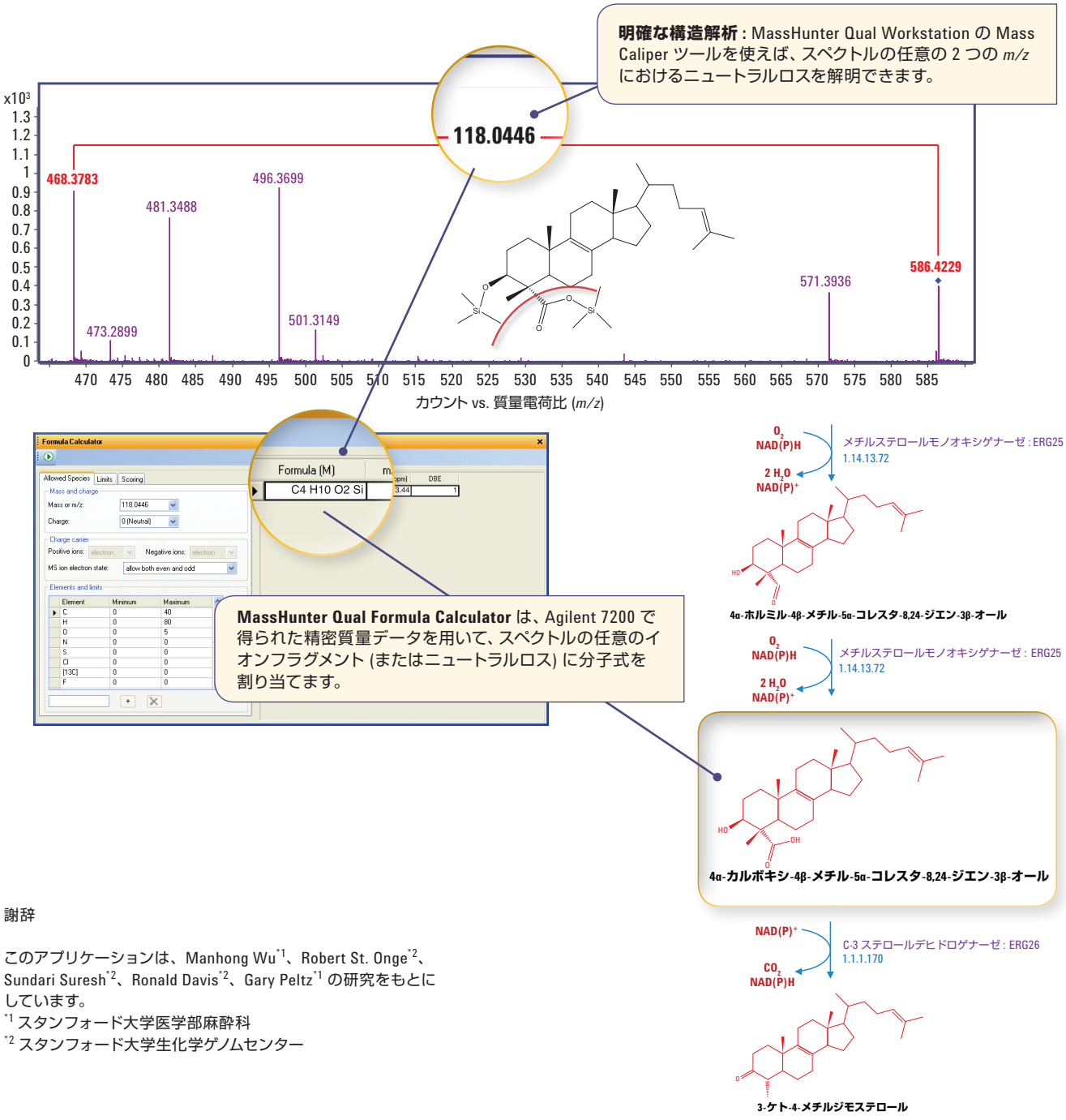
精密質量プロダクトイオンスペクトルにより、
未知化合物の構造解析を円滑に実行できます。



精密質量プロダクトイオンスペクトルをもとに提示された代謝物の構造を確認

メタボロミクス研究では、データの生物学的解釈に重要な影響を及ぼす可能性があることから、非ターゲット化合物や未知化合物の有意量も重視されます。そのため、こうした重要な代謝物の構造を確認または解析する必要があります。

Agilent 7200 Q-TOF for GC/MS と MassHunter Workstation ソフトウェアの組み合わせは、このような研究に最適です。



謝辞

このアプリケーションは、Manhong Wu[*1]、Robert St. Onge[*2]、Sundari Suresh[*2]、Ronald Davis[*2]、Gary Peltz[*1] の研究をもとにしています。

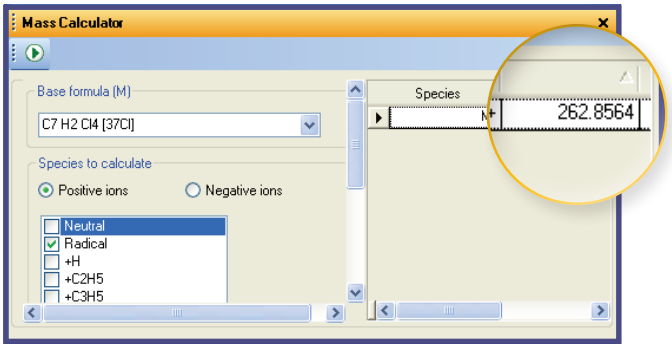
[*1] スタンフォード大学医学部麻酔科
[*2] スタンフォード大学生化学ゲノムセンター

Agilent 7200 Q-TOF for GC/MS の詳細については、**www.agilent.com/chem/jp** をご覧ください。

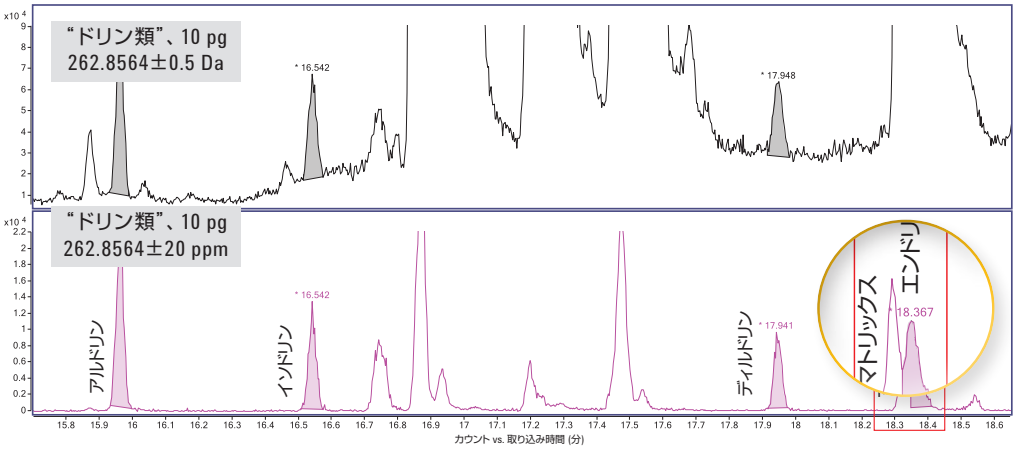
マトリックス中の汚染物質の確実なスクリーニングと同定

包括的な食品安全性スクリーニングでは、頻繁に検出される汚染物質の定量分析と、非ターゲット化合物や未知化合物の定性分析の両方をおこなう必要があります。

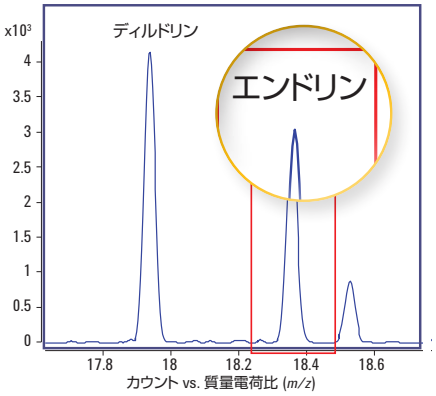
分析の成功は、フルスキャンモードの優れた感度と、ターゲット確認や未知化合物分析のための精密質量データにかかっています。



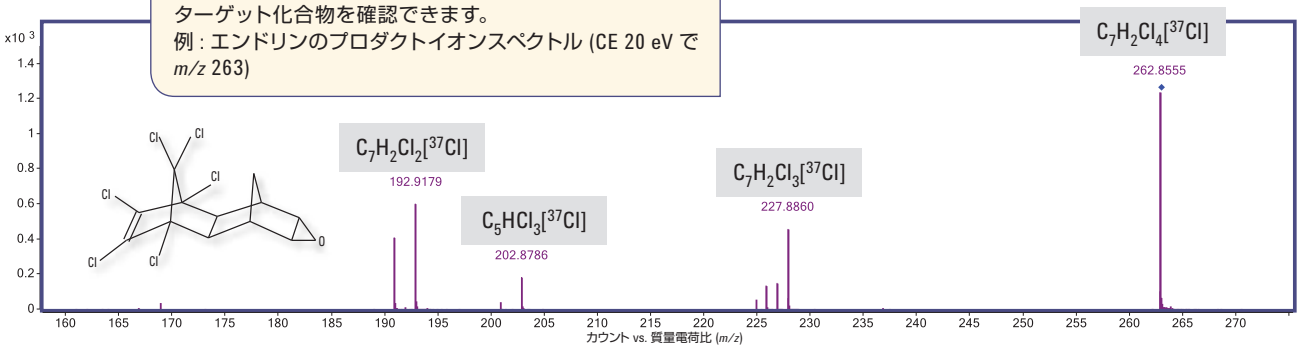
MassHunter Qual Mass Calculator を使えば、ターゲット化合物の理論的質量を EI モードと CI モードの両方で得られます。理論的質量を用いれば、さらなる定量分析や定性分析が可能です。



MS/MS モードの究極の感度：Agilent 7200 Q-TOF for GC/MS では、高分解能/精密質量のみでは不十分な場合でも、共溶出するマトリックス干渉からターゲット化合物を容易に分離することができます。



Q-TOF MS/MS モードを使えば、複雑なマトリックス中のターゲット化合物を確認できます。
例：エンドリンのプロダクトイオンスペクトル (CE 20 eV で *m/z* 263)

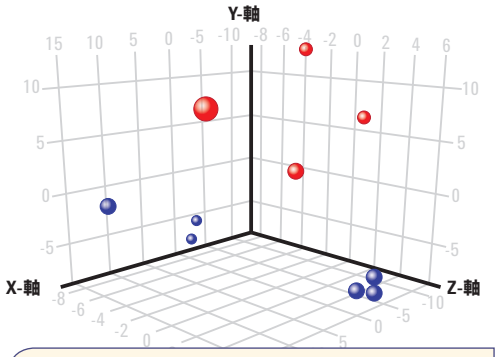


食品試験

オリーブオイルの分析

Mass Profiler Professional (MPP) ソフトウェアを用いて、エクストラバージンオリーブオイルの官能試験の合否を予測できる、GC/Q-TOF データにもとづくモデルを構築しました。このモデルで 5 つの化合物を用いて、官能試験の結果を予測しました。

モデルで用いた化合物の分子イオンを確認するためには、EI スペクトルデータに加えて、ポジティブ CI 精密質量スペクトルが必要でした。

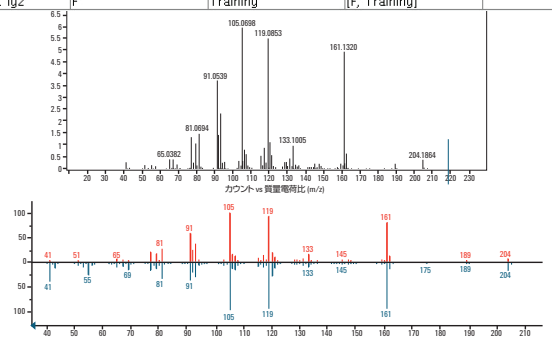


MPP の 主成分分析 (PCA) は、データのクラスター状態を明らかにします。青いサンプルは官能試験に合格したもの、赤いサンプルは不合格だったものです。

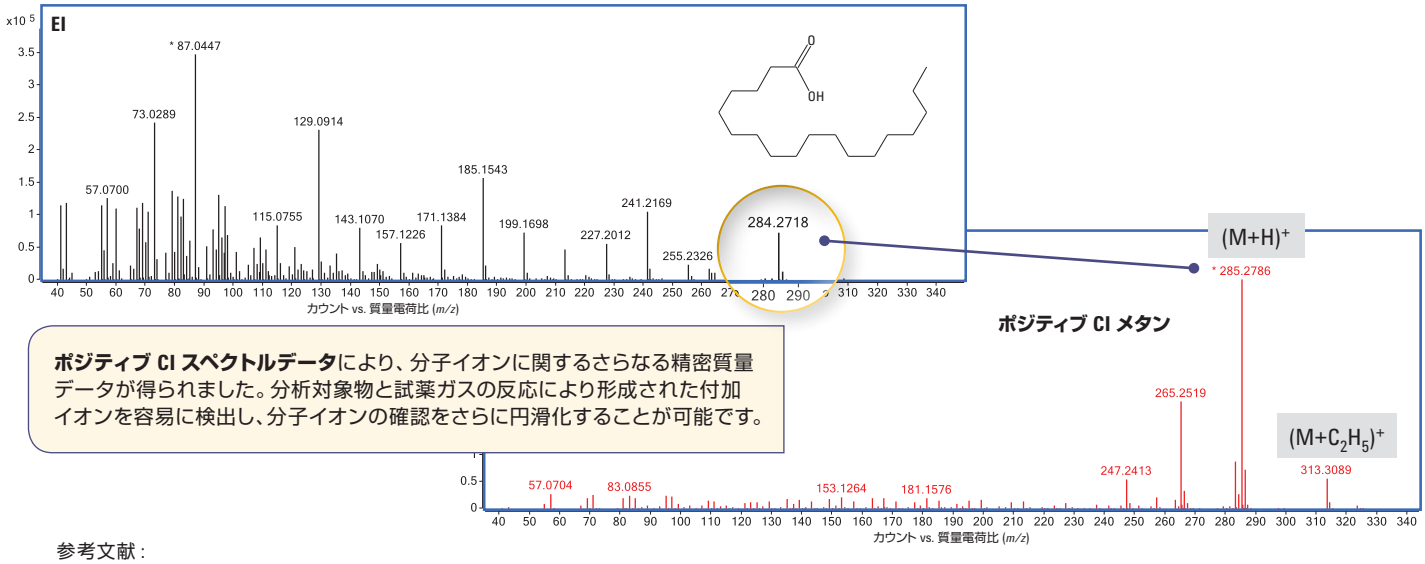
MPP Prediction Model では、すべてのサンプルの合否を正確に予測できました。予測モデルの構築に用いられなかったサンプルについては、トレーニング変数の欄に「None」と記載されています。

Prediction Results

Identifier	Grade	Training	Predicted(Class Pre...	Confidence
PAC1-EI-1: Ig2	F	None	[F, Training]	1.000
ESC2-EI-1: Ig2	P	Training	[P, Training]	1.000
ESC1-EI-1: Ig2	P	Training	[P, Training]	1.000
SAC1-EI-1: Ig2	F	None	[F, Training]	1.000
RFC2-EI-1: Ig2	P	None	[P, Training]	1.000
RSA2-EI-1: Ig2	P	None	[P, Training]	1.000
CSC1-EI-1: Ig2	F	Training	[F, Training]	1.000
RSA1-EI-1: Ig2	P	Training	[P, Training]	1.000
EFC1-EI-1: Ig2	P	None	[P, Training]	1.000
FSW2-EI-1: Ig2	F	Training	[F, Training]	1.000



Agilent 7200 Q-TOF for GC/MS で生成されたスペクトルは、一般に提供されている整数表示の EI スペクトルライブラリ検索に使用できます。



ポジティブ CI スペクトルデータにより、分子イオンに関するさらなる精密質量データが得られました。分析対象物と試薬ガスの反応により形成された付加イオンを容易に検出し、分子イオンの確認をさらに円滑化することが可能です。

参考文献 :

Agilent GC/Q-TOF を用いたコーヒー中の揮発性硫黄化合物の分析 :
文献番号 5990-9076JAJP
Agilent GC/Q-TOF MS と MPP ソフトウェアを用いたオリーブオイルの分析 :
文献番号 5991-0106JAJP

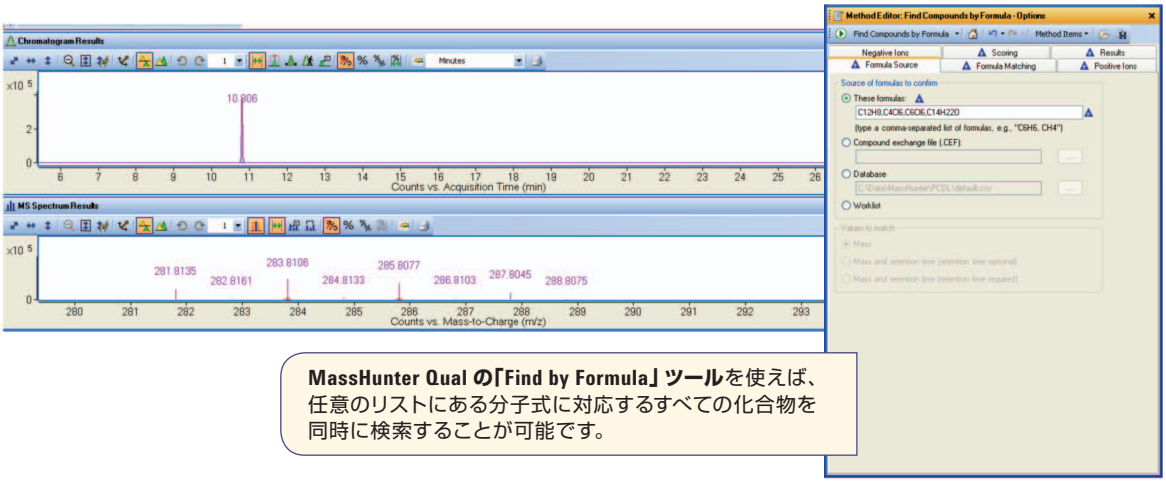
Agilent 7200 Q-TOF for GC/MS の詳細については、
www.agilent.com/chem/jp をご覧ください。

環境

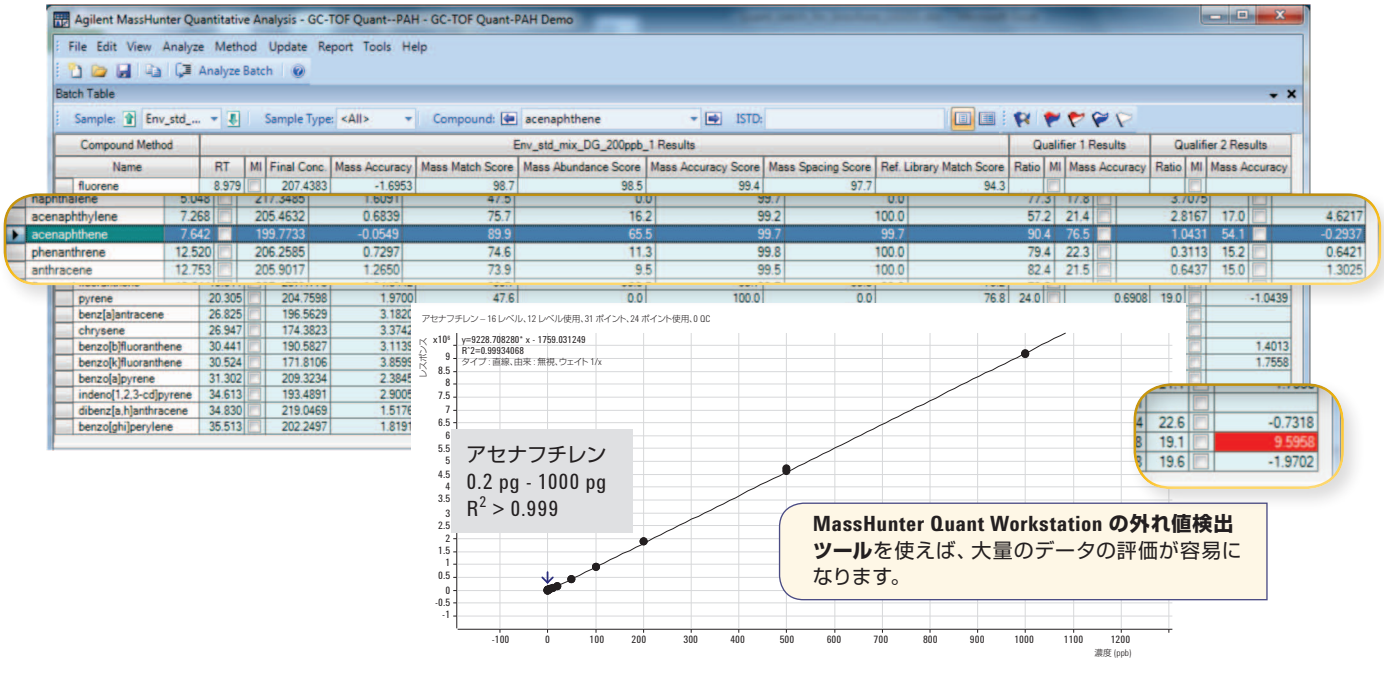
ターゲット化合物のスクリーニングと未知化合物の同定

環境分析における最大の難問は、多数の化合物を同定および定量しなければならない点です。化合物の多くは、複雑なマトリックス中に微量レベルで存在しています。このようなアプリケーションでは、次の機能が不可欠です。

- 高感度の精密質量フルスペクトル取り込み
- 広いダイナミックレンジ
- 容易に自動化できる定性分析
- ターゲット化合物のバッチ処理



MassHunter Qual の「Find by Formula」ツールを使えば、任意のリストにある分子式に対応するすべての化合物を同時に検索することが可能です。



MassHunter Quant Workstation の外れ値検出ツールを使えば、大量のデータの評価が容易になります。

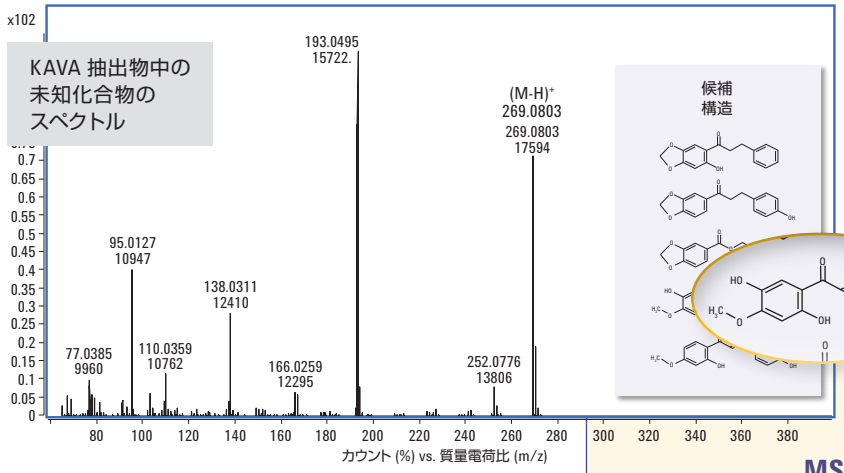
参考文献 :

Agilent 7200 GC/Q-TOF を用いた原油中バイオマーカーの分析 :
文献番号 5990-9477JAJP

精密質量とプロダクトイオンスペクトルにより未知化合物の構造を解析

ハーブ抽出物には、同定の必要な化合物が多く含まれます。しかし、一般に提供されている EI スペクトルライブラリには、分析対象化合物の質量スペクトルデータが登録されているとは限りません。こうした場合、各フラグメントイオンの関連性を特定し、構造上の相関性を解明するためには、Agilent 7200 Q-TOF for GC/MS で生成する精密質量プロダクトイオンスペクトルが貴重なツールとなります。

KAVA 抽出物中の未知化合物の同定



5 つの構造候補のうち、複数のプリカーサイオンに関する MS/MS 分析で測定されたロスに適合するものは 1 つだけです。

MS/MS 分析

	m/z (実験値)	分子式	誤差 (ppm)	スコア
$(M\text{-}H)^+$	269.0803	$C_{16}H_{13}O_4$	-1.99	80.7
$(M\text{-}C_6H_5)^+$	193.0494	$C_{10}H_9O_4$	-0.18	96.7
$(M\text{-}CH\text{=}CH\text{-}C_6H_5)^+$	167.0334	$C_8H_7O_4$	-2.9	N/A
$(M\text{-}CH_2\text{=}CH\text{-}C_6H_5)^+$	166.0259	$C_8H_6O_4$	-0.96	N/A
-CO	138.0311	$C_7H_6O_3$	-0.33	98.1
-CO	110.0359	$C_6H_6O_2$	-3.01	N/A
$-CH_3$	95.0127	$C_5H_3O_2$	-0.59	99.5

プロダクトイオンスペクトルの精密質量データにより、同じ整数質量をもつ異なるニュートラルロスを明確に識別できます。

優れたピーク同定と構造解析が可能な Agilent 7200 Q-TOF for GC/MS は以下のようなアプリケーションに最適です。

食品および香料
- 天然物

エネルギー /化学
- 品質管理
- 石油製品中の微量分析対象物の検出

法医学/毒物学
- ドーピングテスト
- 検視スクリーニング、検出、確認

Agilent 7200 Q-TOF for GC/MS の詳細については、**www.agilent.com/chem/jp** をご覧ください。

信頼性と一貫性の高い分析を実現する業界最高の GC と GC/MS システム

Agilent 7890 シリーズ GC : 優れた分離、優れた MS性能

- **比類のない信頼性** : 第 5 世代の電子ニューマティクスコントロールとデジタルエレクトロニクスにより、リテンションタイムロッキング精度の水準が向上します。
- **生産性の向上** : オーブン昇温/冷却の高速化と最先端の自動機能により、分析のサイクル時間を短縮し、イオン源メンテナンスの手間を軽減できるため、これまでよりも短い時間でより多くの分析を実施できます。
- **堅牢なバックフラッシュ機能** : リテンションタイムの安定性を高め、測定サイクルを高速化します。

Agilent 5975C シリーズ GC/MSD

- 最先端の分離機能
- 強力な生産性拡張機能
- リアルタイムの自己モニタリングをおこなう機器インテリジェンス

Agilent 240 イオントラップ GC/MS

- 幅広いイオン化およびスキャンテクニック – EI、CI、MS/MS、MS^n
- 最高の EI および CI フルスキャン感度
- 堅牢な動作と稼働時間の向上

Agilent 7000 シリーズトリプル四重極 GC/MS

- GC 分析専用の独自の高温石英四重極アナライザを備えた唯一のトリプル四重極 GC/MS
- フェムトグラム域のルーチン感度と優れた選択性
- 最高毎秒 500 MRM トランジション

Agilent GC および GC/MS アナライザ

- すぐに使えるようにパッケージ化されたワークフローソリューション
- 60 以上の主要アプリケーションに対応
- 特定のアプリケーションメソッドをあらかじめ設定し、工場にて確認用標準混合物によるテストを実施

機器の最高性能を維持し、ラボの生産性を向上

クロマトグラフィー分野の世界的なリーダーであるアジレントは、
革新的なサンプル前処理製品、GC カラム、関連消耗品を提供し、
きわめて困難な分析にも対応します。

前処理を簡素化し、正確かつ再現性の高い結果を実現

アジレントはお客様の分析や機器の条件に適した幅広いサンプル前処理製品を提供しています。

- **Agilent Bond Elut ポリマー SPE 製品**を使えば、きわめてクリーンな抽出物を生成し、複雑なマトリックスからの干渉を選択的に除去できます。30 以上のフォーマットで提供される 40 以上の相から、最適なものを選択できます。現在、もっとも充実したラインナップです。
- **QuEChERS キット**を使えば、より高速で簡単、信頼性の高いサンプル前処理を低コストで実現できます。

信頼性の高い微量分析を実施

Agilent ウルトライナート GC の各ソリューションは、フローパスを不活性化します。今日の分析で要求される ppb、さらには ppt レベルの検出下限が実現します。

- **Agilent J&W ウルトライナート GC カラム**は、業界でもっとも厳しいテスト混合物によりテストされ、一貫した不活性と優れた低カラムブリードが確認されています。
- **Agilent ウルトライナートライナ**を使えば、ガラスウールを用いる場合でも用いない場合でも、信頼性と再現性の高い、堅牢な不活性フローパスが実現します。

詳細については、**www.agilent.com/chem/jp** をご覧ください。

アジレントは、専門知識、サービス、IT 技術を駆使してお客様を支援します。

コンプライアンス

アジレントは、累計10万件を超える適格性確認を実施してきました。この経験を活かして規則遵守に必要となるシステムの適格性確認や較正証明を確実に提供いたします。

リアルタイムのサポートとレポート

各機器に内蔵された「システムインテリジェンス」により、問題をあらかじめ回避し、最高の稼働時間と生産性を実現します。

Agilent OpenLAB

食品、医薬品、土壌、水などの分析で得られるデータは、複雑化と大容量化の一途をたどっています。そのため、未処理データを使用可能な状態に変換する必要性が生じています。Agilent OpenLAB ELN と OpenLAB ECM は、データの採取、解析、共有を支援し、共同作業を円滑化しながら、知的財産の保護と整理を容易にします。

Agilent バリュープロミス

アジレントでは、ご購入から 10 年間、機器が使用できることを保証しています。アップグレードの際には、システムの残存価値に見合ったプランを提供します。

Agilent サービスギャランティ

Agilentサービス契約期間中に、修理で問題が解決しないことがあれば、機器を無料で交換します。このサービスを提供しているベンダーはアジレントだけです。

ホームページ **www.agilent.com/chem/jp**
カストマコンタクトセンタ
0120-477-111

本書に記載の情報は予告なく変更されることがあります。

アジレント・テクノロジー株式会社
© Agilent Technologies, Inc. 2012
Printed in Japan March 14, 2012
5990-9898JAJP

Agilent Technologies